

Análisis computacional de la adsorción del colorante Reactive Black 8 en un hidrogel de quitosano mediante el método semi-empírico PM3

Ángel Yupa Contreras¹; Norma Aurea Rangel-Vázquez¹; Yectli A. Huerta²

¹ TecNM/Instituto Tecnológico de Aguascalientes, Aguascalientes.

² Minnesota Supercomputing Institute, UMN, USA.

Área: Ciencias biológicas y ambientales.

Resumen

El quitosano es un adsorbente eficaz, debido a que presenta un bajo costo, no contamina el medio ambiente y se puede utilizar para eliminar diversos colorantes; sin embargo, es necesario conocer su mecanismo de adsorción. El objetivo de la investigación fue, identificar el mecanismo de adsorción del colorante *Reactive Black 8* (RB8) en un hidrogel a base de quitosano y entrecruzado con glutaraldehído (Q/G), utilizando el método semi-empírico PM3. Los resultados indicaron que la adsorción se lleva a cabo espontánea y exotérmicamente con un ΔG_{Ads} de -43.98 kcal/mol. El mecanismo presenta interacciones puente de hidrógeno que involucran a los grupos $-\text{NH}_2$ y $-\text{OH}$.

Palabras clave: Adsorción, Simulación, RB8, Semi-empírico PM3.

Abstract

Chitosan is an effective adsorbent because it is inexpensive, environmentally friendly, and can be used to remove various dyes; however, its adsorption mechanism needs to be understood. The objective of this research was to identify the adsorption mechanism of the Reactive Black 8 dye (RB8) on a chitosan-based hydrogel

crosslinked with glutaraldehyde (Q/G) using the semi-empirical PM3 method. The results indicated that adsorption occurs spontaneously and exothermically with a ΔG_{Ads} of -43.98 kcal/mol. The mechanism involves hydrogen bonding interactions between the $-\text{NH}_2$ and $-\text{OH}$ groups.

Keywords: Adsorption, Simulation, RB8, PM3 Semi-empirical.

Introducción

La industria textil representa la industria con mayor contaminación del agua debido al amplio uso de colorantes y pigmentos en los diversos procesos, sin embargo, el 50% de los colorantes utilizados no queda impregnado en el textil, lo cual genera una disminución del oxígeno en el agua produciendo efectos anaeróbicos y anoxicas, respectivamente (Solis et al., 2013; Gallego-Ramírez et al., 2021). El colorante RB8 es del tipo aniónico y monozo, específicamente de los basados en complejos de cromo, que tiene como grupo reactivo al mono-amino clorotriazina. Es utilizado en la industria textil por su bajo precio; sin embargo, es muy tóxico para el medio ambiente debido a que es difícil de eliminar (Cho

et al., 2009; Wu et al., 2012; Kamenická et al., 2024).

Existen diversas metodologías para la eliminación de contaminantes del agua como la adsorción, oxidación, floculación, osmosis, intercambio iónico, ozonización. Sin embargo, la adsorción representa la tecnología más eficiente, económica y eficaz en la eliminación de colorantes debido a que el material adsorbente puede ser regenerado. Algunos materiales adsorbentes son, hidrogeles, carbón activado, arcillas y materiales lignocelulósicos, óxido de grafeno, estructuras metalorgánicas (Pavithra et al., 2019; Pérez-Calderón et al., 2020).

Los hidrogeles son materiales tridimensionales que pueden adsorber grandes cantidades de agua o fluido biológico y se pueden obtener de diversos materiales naturales como el quitosano, el cual es biocompatible y biodegradable (Sánchez-Cid et al., 2023). Los hidrogeles se utilizan en tratamiento de agua, odontología, agricultura, textil.

Actualmente, existen diferentes estudios experimentales sobre la remoción de RB8, utilizando diversos materiales adsorbentes como: Filipkowska (2006) que utilizó quitina, hojuelas de quitosano y perlas de quitosano; Gu et al. (2011) utilizaron diatomea natural. Dandil et al. (2019) utilizaron quitosano entrecruzado con glutaraldehído. Thiagarajan & Dheenathayalan (2019) emplearon polianilina dopada con CuCl_2 . Filipkowska & Józwiak (2024) usaron hojuelas de quitina, hojuelas de quitosano, perlas de

quitosano y perlas modificadas de quitosano. Sin embargo, no se han reportado estudios computacionales del hidrogel Q/G como material adsorbente.

Por otro lado, los estudios computacionales suelen utilizar el método de la teoría del funcional de la densidad (DFT) pero no considera al adsorbente. Una solución es la obtención de la energía de adsorción (E_{Ads}), que sí considera el modelo propuesto de adsorbente; sin embargo, su limitación es el alto tiempo de simulación (Malloum et al., 2023). Una alternativa al cálculo DFT, para sistemas grandes, es el uso de un cálculo secuencial de mecánica molecular (MM) y métodos semi-empíricos, que aprovechan la rapidez en el cálculo del primero, y la precisión en los resultados del segundo.

La MM basada en las leyes de la física clásica, y que representa las moléculas como un conjunto de esferas (átomos) unidas por resortes (enlaces), es rápida y permite modelar sistemas extensos sin embargo, no proporciona información electrónica del sistema. Por otra parte, los métodos semi-empíricos son adecuados para moléculas medianas y grandes. Estos métodos incorporan parámetros basados en datos teóricos y/o experimentales, a fin de acelerar los cálculos y reducir el error introducido por las simplificaciones.

El método semi-empírico PM3 se caracteriza por representar exactamente los enlaces puente de hidrógeno y predecir con mayor precisión los calores de formación, a través de una mejora en el

método de optimización (Stewart, 1989). Así el objetivo del estudio fue utilizar el modelo PM3 para analizar la adsorción del colorante RB8 en un hidrogel a base de quitosano.

Materiales y métodos

Los cálculos computacionales se realizaron en una computadora Dell con procesador Intel ® Core i5 – 4460 CPU de 3.20 GHz, con un sistema operativo Window 10 de 64 bits y 8 GB de RAM. Primero, en la etapa de modelación, se utilizó el software *HyperChem*® con el método semi-empírico PM3; mediante el algoritmo del gradiente conjugado de Polak-Ribiere con un criterio de convergencia de 0.01 kcal/(Å mol) o 10000 ciclos.

Enseguida, durante la etapa de optimización de la geometría del colorante RB8, hidrogel y la adsorción se obtuvo mediante una pre-optimización inicial, utilizando el comando *Configurational Search* con el campo de fuerza CHARMM y una posterior optimización empleando el método semi-empírico PM3.

El hidrogel (Q/G) se representó mediante su oligómero, con un porcentaje de desacetilación del 75%. La estructura se construyó utilizando el comando *Sugar Builder*, que comprende de dos cadenas de quitosano unidas por una molécula de glutaraldehído; las cadenas de quitosano se conformaron de tres anillos GlcN (Glucosamina) y un anillo de GlcNAc (N-acetil-glucosamina) en sus formas isoméricas β-D y unidas mediante un enlace glucosídico 1→4; posteriormente se

optimizó la estructura molecular. El sistema hidrogel–RB8 se obtuvo aproximando la molécula de RB8 a la molécula de hidrogel; para luego optimizar el sistema.

Finalmente, la etapa de análisis contempló el cálculo de propiedades como, las energías moleculares (E_{Enlace} , ΔG y $\Delta H_{\text{form.}}$), las propiedades QSAR (área superficial, volumen y coeficiente de reparto (Log P)), mapas de potencial electrostático (MEP's) y espectros de FTIR (visualizado con el software *Spartan'14*). La energía de adsorción ($\Delta G_{\text{Ads.}}$) se calculó con la ecuación

$$(1). \quad \Delta G_{\text{Ads.}} = \Delta G_{\text{Sistema}} - (\Delta G_{\text{Hidrogel}} + \Delta G_{\text{RB8}}) \quad (1)$$

Resultados y discusión

a) Caracterización del RB8 y el hidrogel Q/G.

La Tabla 1 y la Figura 1 indican que la estabilidad del colorante RB8 es debido a que tiene un único grupo azo conteniendo anillos aromáticos. Además, la presencia del grupo amino desactiva posteriores sustituciones en el anillo triazina (El-Faham et al., 2020; Ahmad et al., 2024). Mientras que, el grupo p-nitrofenol genera la estabilidad de la molécula debido a la presencia de sistemas conjugados entre el anillo bencénico y los grupos -OH y -NO₂ que permiten reducir la densidad electrónica en todo el grupo (El Mhammedi et al., 2009; Zhang et al., 2022). Kamenická et al. (2024) reportaron un Log P, experimental, de -1.34 para RB8; posiblemente por la formación de complejos de cromo entre sus moléculas y la

presencia de grupos $-SO_3H$ con capacidad de formar mayor cantidad de enlaces puente de hidrógeno a diferencia de los grupos $-SO_3Na$. El hidrogel Q/G es más estable que RB8; debido a las múltiples interacciones puente de hidrógeno intramolecular que posee a lo largo de su estructura. Además, el hidrogel presenta una mayor área superficial que favorece a la adsorción (Ávila-Camacho & Rangel-Vázquez, 2024; Kamenická et al. 2024).

Tabla 1. Parámetros energéticos y geométricos de los compuestos en estudio.

Propiedad	RB8	Hidrogel Q/G
Energías moleculares		
ΔG (kcal/mol)	-189,465	-504,522
E_{Enlace} (kcal/mol)	-5,761	-19,665
$\Delta H_{\text{form.}}$ (kcal/mol)	-228	-1,666
Área superficial ($\text{\AA}^2$)	764	1,514
Volumen ($\text{\AA}^3$)	1,336	3,276

Elaboración propia.

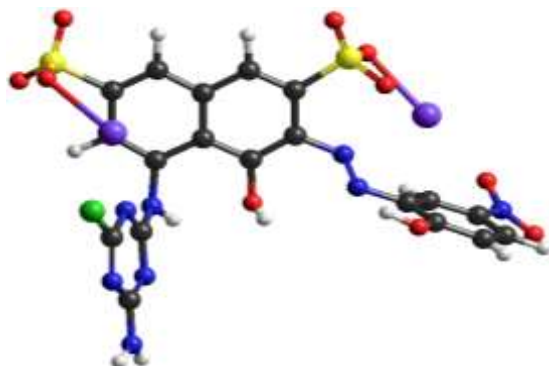


Figura 1. Geometría de optimización del RB8.

Nota: Elaboración propia.

La Tabla 2 muestra las energías de los orbitales HOMO y LUMO de una molécula representan la capacidad de donar o aceptar electrones, respectivamente. La diferencia de energía HOMO-LUMO (E_{Gap}) es un indicador de reactividad de la molécula, un gran valor de este implica una menor reactividad química (Akintemi et al., 2022). El índice de electrofilicidad (ω) mide la tendencia de una molécula de aceptar electrones o la resistencia de la molécula al intercambio de electrones con el medio ambiente; por lo tanto, un mayor valor de ω indica mayor carácter electrofílico y un menor valor de ω indica un mayor carácter nucleofílico (Devi et al., 2022; Hadigheh-Rezvan, 2024). Además, se sabe que electrófilos puede ser fuertes ($\omega > 1.5$ eV), moderados ($0.8 \text{ eV} < \omega < 1.5 \text{ eV}$) y ligeros ($\omega < 0.8 \text{ eV}$) (Rijal et al., 2023). En la Tabla 2 se puede observar que, el RB8 es un electrófilo muy fuerte.

Tabla 2. Descriptores de reactividad molecular.

Colorante	E_{HOMO} (eV)	E_{LUMO} (eV)	E_{GAP} (eV)	ω (eV)
RB8	-8.67	-1.75	6.92	3.92

Elaboración propia.

El mapa de potencial electrostático (MPE) del RB8 se muestra en la Figura 2, en donde las zonas de mayor densidad electrónica son los átomos de oxígeno pertenecientes al grupo $-SO_3Na$, del grupo $-NO_2$, así como también los átomos de nitrógeno pertenecientes al anillo triazina di y monosustituido; estos sitios son susceptibles a ataques nucleofílicos. Las zonas de baja densidad electrónica se dan en los átomos de hidrógeno del

-NH₂ y -OH; y del anillo bencénico disustituido; las zonas mencionadas son susceptibles a ataques electrofílicos. Stefaniu & Pintilie (2018) señalaron que las zonas de baja y alta densidad electrónica (de color rojo y azul, respectivamente) son regiones hidrofílicas y las regiones neutrales (de color verde) son regiones hidrofóbicas; lo que explica la mayor y menor solubilidad.

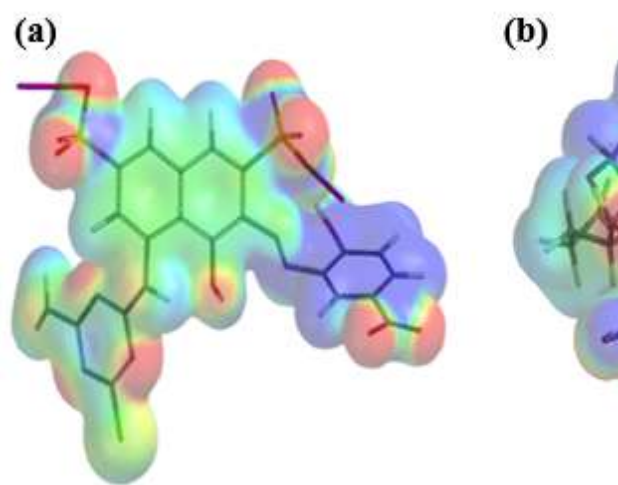


Figura 2. Mapas de potencial electrostático de: (a) RB8 y (b) hidrogel de quitosano/glutaraldehído.

Nota: Elaboración propia.

El espectro FTIR del colorante RB8 de la Figura 3 muestra las siguientes vibraciones: el estiramiento del enlace -OH presenta una frecuencia de 3868 cm⁻¹ cuando está enlazado al naftaleno y una frecuencia de 3609 cm⁻¹ cuando está enlazado al benceno en posición *-para*. El enlace -NH₂ presenta estiramiento simétrico, estiramiento asimétrico y flexión en el plano a las frecuencias de 3533, 3443 y 1669 cm⁻¹, respectivamente. El enlace -NO₂ presenta un

estiramiento asimétrico a una frecuencia de 1899 cm⁻¹ y una flexión fuera del plano a 767 cm⁻¹. El estiramiento del enlace N=N se observa a 1895 cm⁻¹. El estiramiento del enlace C=N del anillo triazina se aprecia a 1651 cm⁻¹. El estiramiento del enlace C-O correspondió a una frecuencia de 1589 cm⁻¹, fuera del rango sugerido de 1260–1180 cm⁻¹. El estiramiento C-N se asignó a 1557 cm⁻¹. El estiramiento del grupo O=S=O se presenta a 854 cm⁻¹, mientras que el estiramiento del grupo O-S-O se presenta a 814 y 618 cm⁻¹. Finalmente, el estiramiento del enlace C-Cl se muestra a 675 cm⁻¹ (Yuen et al., 2005).

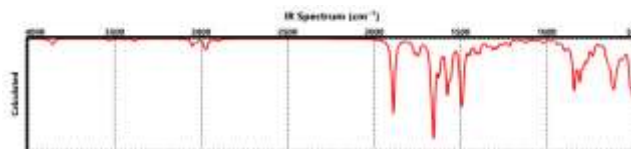


Figura 3. Espectro de FTR del RB8.

Nota: Elaboración propia.

b) Adsorción del RB8 en el hidrogel.

La Figura 4 muestra que el arreglo óptimo de la adsorción del colorante RB8 es aquella donde el colorante se ubica paralela a la superficie del adsorbente. Esto se atribuye a que una mayor área de contacto entre el colorante e hidrogel favorece a las interacciones entre ambas. Los valores negativos de ΔG (-694031 kcal/mol) y ΔH_{form} (-1938 kcal/mol) indicaron que la adsorción fue exotérmica y espontánea; además de una ΔG_{Ads} de -43.98 kcal/mol.

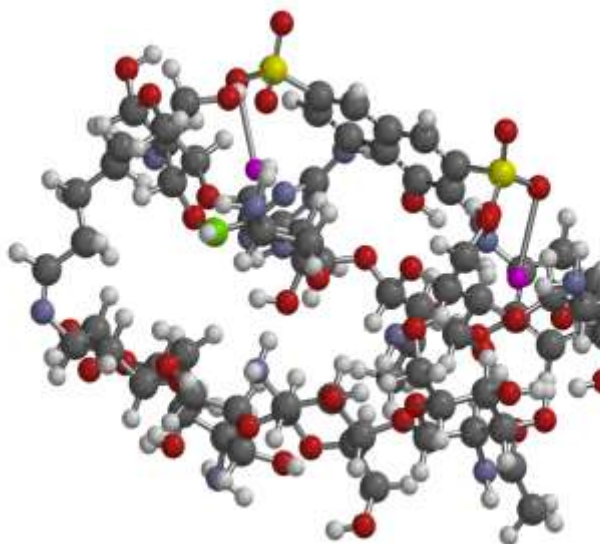


Figura 4. Adsorción del colorante RB8 en el hidrogel Q/G en donde, color rojo: oxígeno, color negro: carbono, color blanco: hidrógeno, color morado: sodio,

color azul: nitrógeno, color amarillo: azufre, respectivamente.

Nota: Elaboración propia.

Según Malloum et al. (2023) concluyeron que los ΔG_{Ads} teóricos se basan en energías electrónicas que no consideran la presión y temperatura del sistema, por lo que estas se encuentran sobreestimadas. Además, se debe de considerar el efecto de la temperatura y el solvente, ya que este último puede alterar la estructura electrónica del soluto. Gu et al. (2011) y Filipkowska (2006) determinaron que el mecanismo de adsorción de RB8 involucra interacciones electrostáticas entre los grupos -NH_4^+ del adsorbente y los grupos -SO_3^- ; ya que este último poseen una alta densidad electrónica como se aprecia en la Figura 5. Además, Monsef Khoshhesab et al. (2015) reportaron la presencia de interacciones puente de

hidrógeno que involucran a los grupos -NH_2 y/o -OH del colorante, aun cuando el soluto y el adsorbente no se encuentren ionizados.

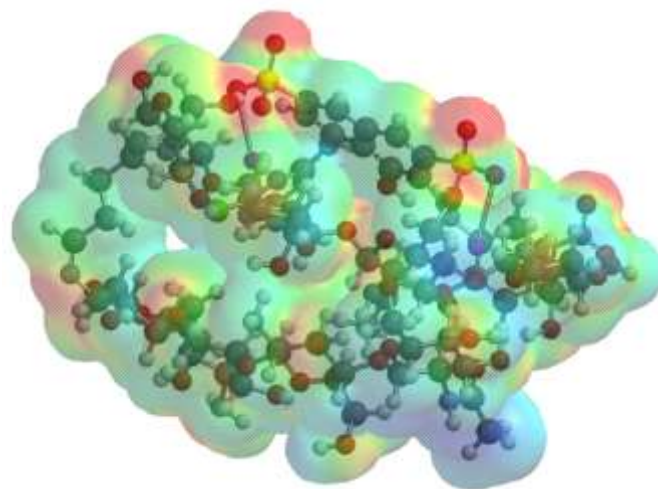


Figura 5. Distribución electrónica del RB8 en el hidrogel Q/G en donde, color rojo: oxígeno, color negro: carbono, color blanco: hidrógeno, color morado: sodio,

color azul: nitrógeno, color amarillo: azufre, respectivamente.

Nota: Elaboración propia.

El espectro de FTIR de la adsorción del colorante RB8 en el hidrogel (ver Figura 6) muestra que a, $3889\text{-}3812\text{ cm}^{-1}$ correspondieron al estiramiento OH, en $3529\text{-}3333\text{ cm}^{-1}$ se asignó al estiramiento asimétrico del CH, entre 3047 y 2816 cm^{-1} se atribuyó al estiramiento simétrico del CH, 1880 cm^{-1} se apreció el estiramiento $\text{C}=\text{C}$ y $\text{N}=\text{N}$, $1778\text{-}1663\text{ cm}^{-1}$ se observó el estiramiento del $\text{C}=\text{C}$ de los anillos bencénicos (Peláez-Cid et al., 2024), 1605 cm^{-1} fue atribuido a la torsión del enlace NH_2 derivado del entrecruzamiento quitosano/glutaraldehído (Balanta et al., 2010; Iftime et al., 2024), en 1593 se observó el

estiramiento de los enlaces C-Cl y N=N (Jha et al., 2015), a 1506 cm^{-1} debido al enlace NH (Sánchez-Cid et al., 2023), a 1458 cm^{-1} se observó la torsión del enlace CH (Balanta et al., 2010), en 1395 cm^{-1} se atribuyó a los estiramientos de los enlaces NH, CN y CO (Vakili et al., 2020), a 1281 cm^{-1} correspondió la interacción SO_3 del colorante y el NH del quitosano (Kouzoutzoglou-Efremidou et al., 2025), en 843 cm^{-1} se atribuyó al balanceo del CH, $808\text{-}788\text{ cm}^{-1}$ correspondió al estiramiento C-C, 621 cm^{-1} fue asignado al enlace CH fuera del plano, 506 cm^{-1} fue atribuido a los enlaces C-C y C-N.

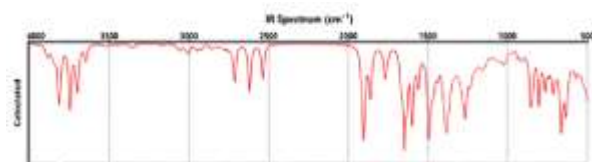


Figura 5. Espectro de FTIR de la adsorción del colorante RB8 en el hidrogel.

Nota: Elaboración propia.

Conclusiones

El presente estudio demostró que la adsorción de RB8 se llevó a cabo exotérmica y espontáneamente, debido a los grupos hidroxilo y amino que generan los sitios activos, además, el colorante ubicado en paralelo a la superficie del adsorbente; con un ΔG_{Ads} de -43.98 kcal/mol . El mecanismo de adsorción involucra, además de las interacciones electrostáticas, posibles interacciones puente de hidrógeno de los grupos -NH_2 y -OH .

Agradecimientos

Al TecNM por el financiamiento del proyecto 21770.25-P: Análisis experimental y computacional de la adsorción monocomponente y binaria de colorantes reactivos textiles negro (5 y 8) y azul (4 y 5) mediante perlas de hidrogel de quitosano aprobado en la Convocatoria Proyectos de Investigación Científica, Desarrollo Tecnológico e Innovación 2025.

Referencias bibliográficas

Ahmad, S. M., (2024). An overview of preparation for different azo compounds. *ANJS*, 27(1), 1–13.

<https://doi.org/10.22401/ANJS.27.1.01>

Ávila-Camacho, B. A., & Rangel-Vázquez, N. A. (2024). Analysis of the adsorption of Hg^{2+} , Ni^{2+} and Cu^{2+} on chitosan hydrogels.

Polímeros, 34(3), e20240035.

<https://doi.org/10.1590/0104-1428.20240053>

Akintemi, E. O., Govender, K. K., & Singh, T. (2022). A DFT study of the chemical reactivity properties, spectroscopy and bioactivity scores of bioactive flavonols. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1210, 113658.

<https://doi.org/10.1016/j.comptc.2022.113658>

Balanta, D., Grande, C. D., & Zuluaga, F. (2010). Extracción, identificación y caracterización de quitosano del micelio de *Aspergillus Niger* y sus aplicaciones como

material bioadsorbente en el tratamiento de aguas. *Revista Iberoamericana de Polímeros*, 11(5), 297-316. <https://reviberpol.org/wp-content/uploads/2019/07/2010-balanta.pdf>

Cho, J., Cho, J. K., Lee, J., Lee, D., Park, C., & Kim, S. (2009). Optimization of salting-out crystallization for an efficient in situ separation of synthetic anthraquinone- and azo-type reactive dyes. *Separation and Purification Technology*, 68(2), 138–144. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2009.04.015>

Dandil, S., Sahbaz, D., & Acikgoz, C. (2019). Equilibrium and kinetic studies of reactive black 8 adsorption onto crosslinked chitosan beads. *Journal of Chemistry and Chemical Engineering*, 13, 1–7. <https://doi.org/10.17265/1934-7375/2019.01.001>

Devi, D., Arasu, M. M. A., & Girija, A. M. (2022). Spectroscopic (FTIR, UV-Vis, NMR) investigations, DFT predictions of global reactivity descriptors and efficient corrosion inhibitors of N-carbobenzoxyl-L-Valine Succinimidyl Ester. *Journal of the Indian Chemical Society*, 99(4), 100400. <https://doi.org/10.1016/j.jics.2022.100400>

El-Faham, A., (2020). Protocol for synthesis of di- and tri-substituted s-triazine derivatives. *MethodsX*, 7, 100825. <https://doi.org/10.1016/j.mex.2020.100825>

El Mhammedi, M. A., Achak, M., Bakasse, M., & Chtaini, A. (2009). Electrochemical

determination of para-nitrophenol at apatite-modified carbon paste electrode: Application in river water samples. *Journal of Hazardous Materials*, 163(1), 323–328. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2008.06.126>

Filipkowska, U. (2006). Adsorption and desorption of reactive dyes onto chitin and chitosan flakes and beads. *Adsorption Science & Technology*, 24(9), 781–795. <https://doi.org/10.1260/026361706781388932>

Filipkowska, U., & Józwiak, T. (2024). The combination of waste products from chitin and sawdust to remove anionic and cationic dyes. *Progress on Chemistry and Application of Chitin and its Derivatives*, 29, 140–155. <https://doi.org/10.15259/PCACD.29.010>

Gallego-Ramírez, C., & Rubio-Clemente A. (2021). Removal of dyes in water from the textile industry through the use of biochar. *AFINIDAD LXXIX*, 596, 98-107. <https://www.raco.cat/index.php/afinidad/article/download/401287/496544>

Gu, Z. P., Yang, X. B., Yang, J. C., & He, S. H. (2011). Study on the adsorption of reactive black on nature diatomite. *Applied Mechanics and Materials*, 90–93, 2991–2994. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMM.90-93.2991>

Hadigheh-Rezvan, V. (2024). Molecular structure, HOMO–LUMO, and NLO studies of some quinoxaline 1,4-dioxide derivatives:

Computational (HF and DFT) analysis. *Results in Chemistry*, 7, 101437.

<https://doi.org/10.1016/j.rechem.2024.101437>

Iftime, M. M., Ailiesei, G. L., & Ailincăi, D. (2024). Tuning antioxidant function through dynamic design of chitosan-based hydrogels. *Gels*, 10(10), 655.

<https://doi.org/10.3390/gels10100655>

Jha, A., Modi, N., Jobby, & R., Desai, N. (2015). Differential expression of antioxidant enzymes during degradation of azo dye reactive black 8 in hairy roots of *Physalis minima* L. *International Journal of Phytoremediation*, 17, 305–312.

<https://doi.org/10.1080/15226514.2013.876963>

Kamenická, B., Maňásková, K., Pouzar, M., & Weidlich, T. (2024). Co-action of ionic liquids with alternative sorbents for removal of reactive azo dyes from polluted wastewater streams. *Applied Sciences*, 14(2), 673.

<https://doi.org/10.3390/app14020673>

Kouzoutzoglou-Efremidou, A. A., Tolkou, A. K., Maroulas, K. N., Kosheleva, R. I., Katsoyiannis, I. A., & Kyzas, G. Z. (2025). Interfacial adsorption interactions of dyes and chitosan/activated carbon@Curcumin derivatives in single-component and binary solutions. *Langmuir*, 41(5), 3603–3622.

<https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.4c04769>

Malloum, A., Adegoke, K. A., Ighalo, J. O., Conradie, J., Ohoro, C. R., Amaku, J. F., Oyedotun, K. O., Maxakato, N. W., Akpomie, K. G., Okeke, E. S., & Olisah, C. (2023).

Computational methods for adsorption study in wastewater treatment. *Journal of Molecular Liquids*, 390, 123008.

<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.123008>

Monsef Khoshhesab, Z., Gonbadi, K., & Rezaei Behbehani, G. (2015). Removal of reactive black 8 dye from aqueous solutions using zinc oxide nanoparticles: Investigation of adsorption parameters. *Desalination and Water Treatment*, 56(6), 1558–1565.

<https://doi.org/10.1080/19443994.2014.967304>

Pavithra, K. G., Kumar, P. S., Jaikumar, V., & Rajan, P. S. (2019). Removal of colorants from wastewater: A review on sources and treatment strategies. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 75, 1-19.

<https://doi.org/10.1016/j.jiec.2019.02.011>

Peláez-Cid, A. A., López-Hernández, D. L., Gómez-Merino, E., & Herrera-González, A. M. (2024). Synthesis of activated carbons using custard apple seeds and their application in the adsorption of textile dyes. *Revista Internacional de Contaminación Ambiental*, 40, 263-278.

<https://doi.org/10.20937/rica.54967>

Pérez-Calderón, J., Santos, M. V., & Zaritzky, N. (2020). Synthesis, characterization and application of cross-linked chitosan/oxalic acid hydrogels to improve azo dye (Reactive Red 195) adsorption. *Reactive and Functional Polymers*, 155, 104699.

<https://doi.org/10.1016/j.reactfunctpolym.2020.104699>

Rijal, R., Sah, M., & Lamichhane, H. P. (2023). Molecular simulation, vibrational spectroscopy and global reactivity descriptors of pseudoephedrine molecule in different phases and states, *Heliyon*, 9(3), e14801.

<https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2023.e14801>

Sánchez-Cid, P., Romero, A., Díaz, M. J., de-Paz, M. V., Perez-Puyana, V. (2023). Chitosan-based hydrogels obtained via photoinitiated click polymer IPN reaction. *Journal of Molecular Liquids*, 379, e121735.

<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.121735>

Solis, M., Gil, J. L., Solis, A., Perez, H. I., Manjarrez, N., & Perdomo, M. (2013). The sedimentation process a simple method to diminish contaminants in textile effluents. *Revista Mexicana de Ingeniería Química*, 12(3), 585-594.

<https://www.scielo.org.mx/pdf/rmiq/v12n3/v12n3a20.pdf>

Stefaniu, A., & Pintilie, L. (2018). Molecular descriptors and properties of organic molecules. En *Symmetry (Group Theory) and Mathematical Treatment in Chemistry*. T. Akitsu, Ed., InTech.

<https://doi.org/10.5772/intechopen.72840>

Stewart, J. J. P. (1989). Optimization of parameters for semiempirical methods I. Method. *Journal of Computational Chemistry*, 10(2), 209–220.

<https://doi.org/10.1002/jcc.540100208>

Thiyagarajan, V., & Dheenathayalan, L. (2019). Adsorption of industrial dyes reactive black 8 and reactive yellow 84 by PANI-CuCl 2:

Kinetics and Isotherm Studies. *Research Journal of Chemistry and Environment*, 23(9), 29–37.

Vakili, M., Zwain, H. M., Mojiri, A., Wang, W., Gholami, F., Gholami, Z., Giwa, A. S., Wang, B., Cagnetta, G., & Salamatinia, B. (2020).

Effective adsorption of reactive black 5 onto hybrid hexadecylamine impregnated chitosan-powdered activated carbon beads. *Water*, 12(8), 2242. <https://doi.org/10.3390/w12082242>

Wu, J., Liu, F., Zhang, H., Zhang, J., & Li, L. (2012). Decolorization of CI reactive black 8 by electrochemical process with/without ultrasonic irradiation. *Desalination and Water Treatment*, 44(1–3), 36–43.

<https://doi.org/10.1080/19443994.2012.691739>

Yuen, C. W. M., Ku, S. K. A., Choi, P. S. R., Kan, C. W., & Tsang, S. Y. (2005). Determining functional groups of commercially available ink-jet printing reactive dyes using Infrared Spectroscopy. *Research Journal of Textile and Apparel*, 9(2), 26–38.

<https://doi.org/10.1108/RJTA-09-02-2005-B004>

Zhang, J., Chen, L., & Zhang, X. (2022).

Removal of p-nitrophenol by nano zero valent iron-cobalt and activated persulfate supported onto activated carbon. *Water*, 14(9), 1387.

<https://doi.org/10.3390/w14091387>



ISSN: 3061-810X

Año 2, Núm. 2, Enero - Abril 2026 pp. 30